第65卷 第3期　　天 文 学 报　　Vol. 65 No. 3
2024年5月　　ACTA ASTRONOMICA SINICA　　May, 2024

doi: 10.15940/j.cnki.0001-5245.2024.03.008

小天体离散元仿真软件的搭建与测试*

刘沐林† 侯锡云‡

(南京大学天文与空间科学学院 南京 210023)

摘要 小天体探测是当今太阳系探测的一大热点, 对小行星演化的研究有助于人们了解太阳系的起源. 演化研究的一项重要内容是小天体结构的演化, 即小天体在多种力学机制作用下自身形状与结构的演化. 在小天体碎石堆结构的假设之下, 一种比较常见的模拟小天体结构演化的方法是离散元仿真算法(Discrete Element Method, DEM), 目前国内外有数个团队开发了相关算法软件. 本文介绍了团队开发的《基于DEM仿真算法的多粒子系统模拟软件》的基础理论、实现方法以及加速算法, 并使用二体接触模型、声速传播仿真、小行星内部压强、小行星旋转稳定性仿真算例验证了算法的可靠性.

关键词 方法: 数值, 小行星: 普通, 小行星: 演化

中图分类号: P132; **文献标识码**: A

1 背景介绍

根据现有的小天体自转速度分布, 目前一个普遍的观点是直径在10^2–10^4 m之间的小天体其结构是碎石堆结构. 碎石堆结构最早被用于地质学, 如矿物开采[1]、月壤研究[2]等, 随着人们对于小行星性质认识的不断加深, 相关研究在小行星领域得到拓展, 譬如小行星自转速度上限[3]、小行星及小行星族的碰撞起源[4–6]、彗星结构[7]等. 这些研究的前提是, 在微引力环境下, 小行星的组成是在自身引力和粘聚力的作用下[8], 由较小的岩石碎块组成的碎石堆的结构, 而基于这一假设所得的研究结果目前可有效地解释地面和就位探测任务的一些观测现象.

在小天体碎石堆结构的前提下, 可以使用离散元方法来对小行星的结构与演化进行研究. 现有的离散元仿真方法最早由Cundall[9]于1971年提出, 用于解决岩体力学的问题. 随后经过数十年的发展, 离散元方法在各个领域得到了广泛应用, Cundall等[10]将离散元仿真方法划分为了4个基本门类: Distinct Element Method、Modal Method、Discontinuous Deformation Analysis、Momentum Exchange Method, 这4种门类对应了不同的接触模型和算法, 可以按照接触过程的计算方法和接触体的“软硬”来进行划分.

Distinct Element Method (DEM)即本文工作所使用的方法, 也称为离散元仿真算法, 计算中忽略接触物体本身发生的形变, 而使用接触体之间的相对位置和重叠来仿真形变的过程, 即硬球的软碰撞. 现有的仿真项目主要有: Parallel k-D Tree Gravity Solver (PKDGRAV)[11]、Discrete Element Model Body (DEMBody)[12]等.

Modal Method与Distinct Element Method相似, 但在计算时会使用模态叠加方法来模拟接触体的形状变化过程, 对于紧密堆积的物体, 这种方法

2023-03-23收到原稿, 2023-05-23收到修改稿

*国家自然科学基金项目(12233003)、空间碎片与近地小行星防御科研项目(KJSP2020020205)资助

†mulinliu@smail.nju.edu.cn

‡xiyunhou@nju.edu.cn

中的特征模式不能很好组织成接触的边界, 因此这种方法更适合在疏松的系统中使用. 现有的仿真项目主要为CICE[13].

Discontinuous Deformation Analysis, 即著名的不连续变形分析方法. 在计算时使用刚性接触, 即仅计算接触时发生的动量转换而不仿真接触的具体过程, 但是在转化过程中将接触体作为弹性体进行处理, 结合了刚体运动和弹性体的形变, 是目前岩体力学领域被大量使用的计算方法.

Momentum Exchange Method, 即考虑刚体的刚性碰撞, 接触体在接触瞬间发生动量交换, 随后分离继续仿真各自的运动状态. 这一方法在计算上开销最小, 在早期的离散元仿真中发挥重要的作用.

为开展小天体结构演化的相关研究, 作者基于离散元仿真算法开发了仿真软件《基于DEM仿真算法的多粒子系统模拟软件》(AstroDEM)[1], 本文介绍了软件构建的细节以及测试算例的结果, 经过结果比较和分析证明了方法的有效性、可靠性和便利性. 第2节中介绍了仿真软件的构建细节, 包括基本原理、使用的基本颗粒单元、力学模型和力学模型参数的选取等; 第3节介绍了使用该软件的一些测试用例, 并对结果进行了讨论; 第4节对文章的工作进行总结.

2 基础理论

仿真软件的动力学模型由仿真基本单元的形状模型和受力模型组成, 这两者目前有诸多实用模型可参考, 下文将简单介绍并明确本文仿真软件选取的模型.

2.1 球形颗粒单元

在仿真中, 球形颗粒单元是最简单直观的仿真基本单元, 即仿真颗粒为具有半径r、密度ρ的匀质球体. 球体颗粒单元不仅可以用于仿真具体的仿真情景, 也可以作为下面球簇模型的基本组成单元, 模拟具有一定空间复杂度的非球形颗粒形状. 仿真颗粒单元的形状对于仿真系统的动力学性质有较大影响, 不同的颗粒单元形状将显著影响颗粒堆的准静止角等性质.

2.2 非球形颗粒单元

虽然球形颗粒单元在仿真中具有在形状和力学模型上容易进行建模和计算的优点, 但是在真实的物理环境下, 颗粒的形状具有很大的不规则性, 这可能会导致整体宏观特性的显著差异, 因此, 一些仿真软件系统也使用非球形颗粒单元来进行仿真. 非球形颗粒形状和接触模型的构造主要有球簇模型[14]和多面体模型[15–16]两种方法.

球簇模型以球形颗粒单元作为基本单元结构, 通过不同的球形颗粒单元叠加的方式组成不同的球簇颗粒形状, 利用球形颗粒单元的接触力学来构筑自身的接触力学, 具有构造便利、没有明显奇点的优点. 对于复杂的非球形颗粒结构, 往往需要使用数十甚至数百个球形颗粒单元作为基本单元来构造, 在仿真中将会大大加大计算量. 在球簇模型的构造过程中, 第一步需要使用扫描、雷达等方式得到一个点与面构成的多面体形状; 第二步使用不同算法[14, 17–19]利用点和面在区域内添加球形颗粒的堆叠, 再使用球簇来模拟复杂形状的外部接触面和质量分布; 第三步使用数值方法计算得到所构造的球簇模型的惯量张量, 进一步对颗粒碰撞的旋转、扭转、质心运动进行仿真. 如图1[14]为使用球簇模型构造的在不同精度下的不同形状颗粒的仿真模型.

多面体模型与球模型有显著的不同. 一方面, 接触力学模型可以划分为面接触、边接触、角接触3种形式[16], 3种形式的接触力模型均作用在多面体单元的组成三角面元上, 对多面体所有面元的受力进行求和, 即可得到多面体单元所受的力与力矩作用, 通过其质量以及惯量张量即可对系统进行外推; 另一方面, 搜索算法上[20], 由于多面体颗粒单元的形状的复杂性, 多面体的接触力学不能完全使用球形颗粒单元所使用的仅仅考虑两颗粒质心距离的搜索算法, 需要考虑额外的多面体形状等更多的参数.

[1]计算机软件著作权登记号: 2024SR0001744

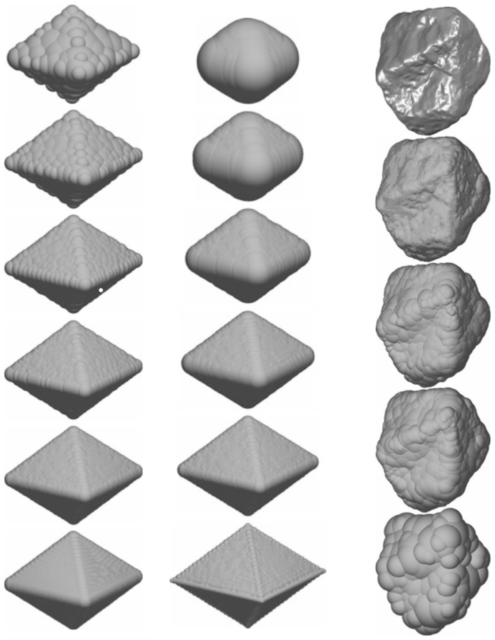

图 1　不同精度参数下的正八面体的球簇模型(左、中)和真实颗粒的球簇模型仿真(右). 左列展示了调整球簇中不同球体之间距离的最小值$d_{\min}$由大到小的结果, 此时随着$d_{\min}$的减小, 正八面体的表面变得光滑; 中列展示了调整球簇中最小组成球体半径$r_{\min}$由大到小的结果, 此时随着$r_{\min}$的减小, 正八面体的表面细节变得更加凸显; 右列展示了两个参数与使用的三维节点数最大比例$p_{\max}$共同作用在一个真实颗粒上的结果, 在不同的参数选择下, 颗粒表面的精细度、粗糙程度和颗粒密度分布有所不同[14].

Fig. 1　Models of a regular octahedron (left, middle) and models of a real particle (right) under different spheres cluster precision setups. The left column displays different models of a regular octahedron with a decreasing value of the minimum distance $d_{\min}$ between each sphere in the cluster from the top to the bottom and it turns out that the surfaces of the models are becoming smoother; the middle column displays different models of a regular octahedron with a decreasing value of the minimum radius $r_{\min}$ of all spheres in the cluster from the top to the bottom and it turns out that the surfaces of the models are becoming more precise; the right column displays different models of a real particle with different $d_{\min}$, $r_{\min}$, the maximum percentage of nodes used denoted as $p_{\max}$ and it turns out that every different setup shows different smoothness, precision and density distribution[14].

2.3　接触力模型

接触力模型是离散元仿真的核心, 可以依据颗粒单元的可形变性划分为硬球和软球模型, 同时, 也可以依据碰撞过程的数值仿真方式划分为硬接触和软接触. 这两种划分的组合便形成了4种可供使用的离散元接触力模型, 它们具有不同的特点, 可以适用于不同的仿真条件.

在本工作中, 目前主要采用球形颗粒单元进行计算. 考虑两颗粒间的接触力, 设两颗粒1、2的位置分别为$\vec{x}_1$和$\vec{x}_2$, 相应的质心运动速度为$\vec{v}_1$和$\vec{v}_2$, 自转角速度分别为$\vec{\omega}_1$和$\vec{\omega}_2$, 颗粒半径分别为r_1和r_2. 于是颗粒1受到颗粒2的接触力作用和力矩可以分别写成:

$$\vec{F} = \vec{F}_{\rm n} + \vec{F}_{\rm fr}\,,$$
$$\vec{M} = -l_1 \hat{n} \times \vec{F}_{\rm fr}\,,$$

其中, $\hat{n} = \frac{\vec{x}_1 - \vec{x}_2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$, l_1为颗粒1的转动臂, 接触力可以分解为法向$\vec{F}_{\rm n}$和切向$\vec{F}_{\rm fr}$两部分, 记号n代表法向(Normal), fr代表真实的摩擦力(Real Friction). 我们在下面子节中详细介绍法向和切向的接触力模型.

2.3.1　法向接触模型

考虑两颗粒发生接触的情形, 对于非刚体颗粒, 接触时将会发生形变并产生接触弹力, 从而将两颗粒向相反方向弹开. 在本文采用的方法中, 系统不对颗粒的形变进行仿真, 而是通过考虑两颗粒之间重叠部分的大小来估计接触时因形变产生的弹力大小[21]. 得到两颗粒相互重叠部分的大小后, 即采用相应法向接触模型和切向接触模型对接触力进行仿真. 图2为两个接触颗粒接触过程计算各个参数的示意图, 定义两颗粒之间距离为$d = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$, l_1和l_2分别为颗粒1和颗粒2的转动臂, 且有:

$$l_1 = \frac{r_1^2 - r_2^2 + d^2}{2d}\,,$$
$$l_2 = \frac{r_2^2 - r_1^2 + d^2}{2d}\,,$$

ξ是两球体的重叠量, 用于表征球体的形变:

$$\xi = r_1 + r_2 - |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|\,.$$

法向接触模型采用带阻尼的弹簧模型, 弹簧模型可以分为两种: 线性弹簧[22]和非线性弹簧[23]. 考

虑弹簧的弹性项和阻尼项, 可以将法向分量$\vec{F}_{\rm n}$进行如下分解:

$$\vec{F}_{\rm n} = \vec{F}_{\rm e} + \vec{F}_{\rm d}\,,$$

其中$\vec{F}_{\rm e}$为弹性项, 使用线性弹簧模型可以表示为:

$$\vec{F}_{\rm e} = k_{\rm n}\xi\hat{n}\,.$$

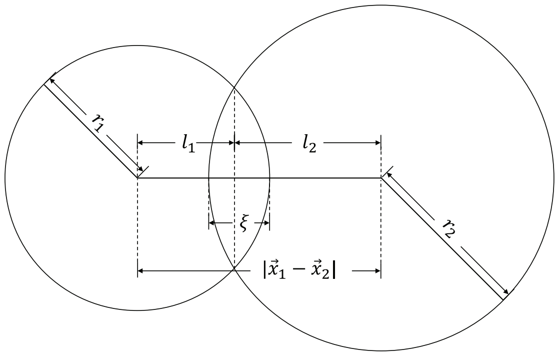

图 2 两颗粒的接触过程计算各参数示意图. 其中, $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$为两颗粒中心之间的距离, l_1和l_2分别为颗粒1和颗粒2的转动臂, ξ是两颗粒的重叠量.

Fig. 2 Demonstration of parameters used in the simulation of two colliding grains. $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ is the distance between the two grains' centers, l_1 and l_2 are rotating arms of grain 1 and grain 2 respectively, and ξ is the overlapping distance of the two grains.

非线性弹簧模型可以表示为:

$$\vec{F}_{\rm e} = k_{\rm H}\xi^{3/2}\hat{n}\,,$$

$k_{\rm n}$为球体的线性弹性系数, $k_{\rm H}$为球体的非线性弹性系数.

$\vec{F}_{\rm d}$为阻尼项, 线性弹簧中可以写作:

$$\vec{F}_{\rm d} = -\gamma\dot{\xi}\hat{n}\,,$$

在非线形弹簧模型中可以使用线性弹簧中相同的表示, 也可以写为[24]:

$$\vec{F}_{\rm d} = -\gamma\dot{\xi}\xi^{1/4}\hat{n}\,,$$

γ为阻尼系数, $\dot{\xi}$表征球体形变的速率, 有: $\dot{\xi} = \vec{v}_{12}\cdot\hat{n}$, 其中$\vec{v}_{12}$可写作: $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 + \vec{\omega}_1\times\vec{p}_1 - \vec{\omega}_2\times\vec{p}_2$, 而$\vec{p}_1 = -r_1\hat{n}$、$\vec{p}_2 = r_2\hat{n}$.

2.3.2 切向接触模型

考虑切向分量$\vec{F}_{\rm fr}$, 在颗粒表面切向颗粒受到的弹力可以表示为:

$$\vec{F}_{\rm t} = -k_{\rm t}D_{\rm H}\hat{t}\,,$$

其中, $k_{\rm t}$为切向弹性系数, 一般取$k_{\rm t} = \frac{2}{7}k_{\rm n}$, $D_{\rm H}$为切向形变历史量[25], 定义为$D_{\rm H} = \int_0^t|\vec{v}_{\rm t}|{\rm d}t$, 此处$t$为当次接触进行总时间, $\vec{v}_{\rm t}$为切向速度, 即:

$$\vec{v}_{\rm t} = \vec{v}_{12} - (\vec{v}_{12}\cdot\hat{n})\hat{n}\,,$$

$\hat{t}$为切向单位向量, 于是有$\hat{t} = \frac{\vec{v}_{\rm t}}{|\vec{v}_{\rm t}|}$. 一般碰撞时会取较小的时间步长以保证仿真的准确性, 故可以将积分表示成如下离散化的形式:

$$D_{\rm H} = \sum|\vec{v}_{\rm t}|\delta t\,.$$

当切向弹性力大于最大静摩擦时, 两球体之间会发生滑动, 此时切向力表现为摩擦力, 有: $\vec{F}_{\rm f} = -\mu|\vec{F}_{\rm n}|\hat{t}$, 于是切向力$\vec{F}_{\rm fr}$取二者之间的较小值, 有:

$$\vec{F}_{\rm fr} = -\min\left(k_{\rm t}D_{\rm H}, \mu|\vec{F}_{\rm n}|\right)\hat{t}\,.$$

于是两颗粒之间接触过程中施加在颗粒1上的转动力矩$\vec{M} = l_1\hat{n}\times\vec{F}_{\rm fr}$.

考虑仿真颗粒与固定平面之间的作用, 颗粒质心受力$\vec{F}$和颗粒所受力矩$\vec{M}$分别为:

$$\vec{F} = \vec{F}_{\rm n} + \vec{F}_{\rm fr}\,,$$
$$\vec{M} = -l_1\hat{n}\times\vec{F}_{\rm fr}\,.$$

但是此时力的表达式有所不同. 首先考虑法向$\vec{F}_{\rm n}$, 同样可以写成$\vec{F}_{\rm n} = \vec{F}_{\rm e} + \vec{F}_{\rm d}$且有$\vec{F}_{\rm e} = k_{\rm n}\xi\hat{n}$和$\vec{F}_{\rm d} = -\gamma\dot{\xi}\hat{n}$, 但是此时有$\xi = r_1 - d^*$, 其中$d^*$为平面和颗粒质心的距离. 设平面的标准方程为$Ax + By + Cz + D = 0$, 颗粒的质心坐标$(x_1, y_1, z_1)$, 于是$d^* = \frac{|Ax_1+By_1+Cz_1+D|}{\sqrt{A^2+B^2+C^2}}$, 而$\dot{\xi}$的表达式有: $\dot{\xi} = \vec{v}_{12}\cdot\hat{n} = (\vec{v}_1 - r_1\vec{\omega}_1\times\hat{n})\cdot\hat{n} = \vec{v}_1\cdot\hat{n}$, 对于切向力, 同样有: $\vec{F}_{\rm t} = -k_{\rm t}D_{\rm H}\hat{t}$, 但是此时$\hat{t}$的表达式有所不同. 考虑切向速度有: $\vec{v}_{\rm t} = \vec{v}_{12} - (\vec{v}_{12}\cdot\hat{n})\hat{n} = \vec{v}_1 - r_1\vec{\omega}_1\times\hat{n} - (\vec{v}_1\cdot\hat{n})\hat{n} = \vec{v}_1 - r_1\vec{\omega}_1\times\hat{n} - \dot{\xi}\hat{n}$, 此时依旧有$\hat{t} = \frac{\vec{v}_{\rm t}}{|\vec{v}_{\rm t}|}$. 同样的, 需要考虑是否滑动, 有: $\vec{F}_{\rm fr} = -\min\left(k_{\rm t}D_{\rm H}, \mu|\vec{F}_{\rm n}|\right)\hat{t}$, 考虑力矩, 有: $\vec{M} = l_1\hat{n}\times\vec{F}_{\rm fr}$, 此时有$l_1\sim d^*$.

2.4 引力模型

考虑颗粒之间的引力, 可以直接在颗粒之间进行计算. 仍然假设颗粒1和颗粒2, 采用和上面相同的标记, 定义颗粒1和颗粒2的质量分别为m_1和m_2, 有颗粒1所受到的颗粒2的引力:

$$\vec{F}_G = -G\frac{m_1 m_2}{|\vec{x_2} - \vec{x}_1|^3}(\vec{x}_2 - \vec{x}_1)\,.$$

考虑计算开销, 假设系统由n个仿真颗粒组成, 那么每次计算整个系统的内部引力作用将需要计算$n!$次颗粒之间的两两引力作用, 计算开销巨大, 因此我们需要对颗粒按照其所在的区域进行分块计算, 具体的计算细节将在下面的章节中展开.

2.5 积分器

在数值仿真中, 可以使用一定的积分器数值算法, 通过已有的动力学模型$\dot{\vec{X}} = \vec{f}(\vec{X}, t)$和$t_0$时刻初值, 就可以计算得到$\vec{X}(t)$, 即得到给定动力学模型和初始条件的仿真结果. 出于对于精度和计算开销的综合考虑, 模型里采用了被称作"蛙跳算法"或"Mid-Step Velocity Verlet"的积分方法[26]78−82.

第一步: 将位置矢量$\vec{x}(t)$和旋转相位矢量$\vec{\theta}(t)$向前推算一步(δt),

$$\vec{x}(t+\delta t) = \vec{x}(t) + \vec{v}(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t^2\,,$$
$$\vec{\theta}(t+\delta t) = \vec{\theta}(t) + \vec{\omega}(t) + \frac{1}{2}\vec{\alpha}(t)\delta t^2\,,$$

其中, $\vec{a}(t) = \frac{\vec{F}(t)}{m}$, m为颗粒的质量; $\vec{\alpha}(t) = \frac{\vec{M}(t)}{I}$, I为颗粒的转动惯量.

第二步: 将速度矢量$\vec{v}(t)$和角速度矢量$\vec{\omega}(t)$向前推算半步($\frac{\delta t}{2}$),

$$\vec{v}(t+\frac{\delta t}{2}) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t\,,$$
$$\vec{\omega}(t+\frac{\delta t}{2}) = \vec{\omega}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t\,.$$

第三步: 计算得到一步后的加速度$\vec{a}(t+\delta t)$和角加速度$\vec{\alpha}(t+\delta t)$,

$$\vec{a}(t+\delta t) = \vec{a}\left[\vec{x}(t+\delta t), \vec{v}\left(t+\frac{\delta t}{2}\right)\right]\,,$$

$$\vec{\alpha}(t+\delta t) = \vec{\alpha}\left[\vec{\theta}(t+\delta t), \vec{\omega}\left(t+\frac{\delta t}{2}\right)\right]\,.$$

第四步: 将速度矢量$\vec{v}(t+\frac{\delta t}{2})$和角速度矢量$\vec{\omega}(t+\frac{\delta t}{2})$向前推算半步($\frac{\delta t}{2}$),

$$\vec{v}(t+\delta t) = \vec{v}\left(t+\frac{\delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}(t+\delta t)\,,$$
$$\vec{\omega}(t+\delta t) = \vec{\omega}\left(t+\frac{\delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{\alpha}(t+\delta t)\,.$$

如此便可以以积分步长δt将仿真向前推进.

2.6 加速算法

在进行多颗粒仿真时, 除了考虑模型的准确性以外, 还需要考虑计算开销的问题. 上文中我们提到, 多颗粒系统在计算时有极大的计算复杂度, 其中, 对计算效率影响最大的就是接触算法和引力算法. 前文已提及, 如果考虑颗粒与每一个颗粒之间的引力相互作用, 那么需要进行$n!$次颗粒间引力的计算, 当n较大时, 开销巨大, 几乎无法进行有效的计算, 因此, 仿真过程需要采取一定的近似, 采用合适的算法来对仿真进行加速. 下文将分别从算法、软件和硬件层面介绍本工作采用的仿真加速技术.

2.6.1 接触加速算法

在进行接触力学计算时, 需要计算两颗粒之间的接触量ξ的值, 当$\xi > 0$时, 认为两颗粒发生碰撞, 需要采用上文中所介绍的接触力学算法对颗粒的受力进行计算. 考虑到, $d = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$为必须进行计算的量, 而绝大多数颗粒都不与某一给定的颗粒发生接触, 如果对每两个颗粒都进行距离的计算, 则产生较大的计算开销. 因为某一给定的颗粒仅有可能与其临近的颗粒发生接触, 所以可以对仿真区域进行网格划分. 不失一般性地考虑矩形六面体仿真区域, 可将其划分为一定密度的正方体网格区域, 仅考虑一个颗粒与其所处网格及相邻网格中其他颗粒的接触, 这种方法被称为Link List方法[26]216−254.

假设仿真区域为$[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \times [z_{\min}, z_{\max}]$所围成的矩形六面体区域, 于是有各方向上的长度: $d_x = x_{\max} - x_{\min}$、$d_y = y_{\max} - y_{\min}$、$d_z = z_{\max} - z_{\min}$, 正方体网格边长为$d_{\rm l}$, 由此得到数量为$\frac{d_x}{d_{\rm l}}\frac{d_y}{d_{\rm l}}\frac{d_z}{d_{\rm l}}$的划分好的方格区域. 为了满足上面

所描述的某个颗粒只有可能与其本网格内或相邻网格中的颗粒发生接触的条件, 有$d_{\rm l} = 2.5r_{\max}$, 其中$r_{\max}$为尺寸最大的颗粒的半径.

对仿真区域进行网格划分之后, 可以对每一个网格进行标号, 用(i_x, i_y, i_z)来表示, 其中, $0 \leqslant i_x \leqslant \frac{d_x}{d_{\rm l}}$, $0 \leqslant i_y \leqslant \frac{d_y}{d_{\rm l}}$, $0 \leqslant i_z \leqslant \frac{d_z}{d_{\rm l}}$, 由此可以对所有网格进行遍历, 并进行颗粒间接触力的计算. 注意到, 两颗粒之间的接触力只需要计算一次, 为避免重复计算, 需要采用一定的计算策略, 从而进一步优化算法.

对于遍历到的网格(i_x, i_y, i_z), 如图3所示, 从上到下展示了上、中、下3层的网格分层结构, 蓝色方格为网格(i_x, i_y, i_z), 绿色为此时参与计算的网格, 红色为不参与计算的网格, 以此遍历所有的网格, 即完成了所有颗粒的接触计算. 由于在接触计算时得到了颗粒间的距离, 此时同时进行颗粒间的引力计算将节约算力.

此算法不仅可以保证不重复遍历网格, 即只通过一次遍历便可以不重复地计算完所有的可能发生的颗粒间接触, 另一方面, 该算法也可以保证在并行计算时尽量少地出现线程竞争的情况, 进一步提升了计算效率.

2.6.2 引力加速算法

上文中提到, 如果考虑颗粒与每一个颗粒之间的引力相互作用, 那么需要进行$n!$次颗粒间引力的计算, 当n较大时, 开销巨大, 因此, 需要进行一定的近似和算法调整来优化和加速计算过程[27]. 对于某一颗粒, 考虑与其距离较远的颗粒的集合, 它们对于该颗粒的引力作用可以近似为这一组颗粒的质心处一质量为这些颗粒总质量的虚拟颗粒的引力作用. 在这种假设下, 将一定数量网格的集合区域组织为正方体方格, 称为Cell. Cell的边长尺寸为网格边长尺寸的整数倍, 并充满整个仿真区域. 设Cell以网格边长为长度单位的边长尺寸为$N_{\rm c}$, 一个Cell 内包含的网格数量即为$N_{\rm c}^3$.

对于同一Cell内的颗粒, 在计算中严格计算颗粒间的引力, 而对于不同Cell内的颗粒之间的引力作用, 仅考虑当前颗粒与其他Cell内处在质心位置的质量为Cell中颗粒总质量的虚拟颗粒的引力作用. 在计算同一Cell内的颗粒间的相互引力作用时, 如图4所示为在一个Cell内进行网格遍历的情况, $N_{\rm c} = 6$. 由于在前面计算接触力时已部分考虑了粒子间的引力(即每个网格区域的所有接触网格都已考虑), 因此只需考虑该Cell内尚未考虑的晶格内的粒子即可. 蓝色网格为此时遍历到的网格, 红色网格表示不参与计算的网格, 绿色区域表示参与计算的网格. 如此便可完成Cell内所有颗粒的引力计算.

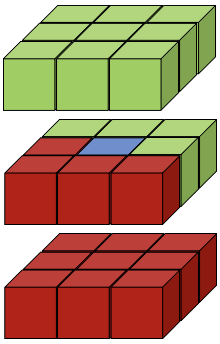

图 3 当前网格中颗粒与临近网格颗粒碰撞时的计算策略. 每一个正方体立方块代表一个网格, 蓝色网格代表当前遍历到的网格(i_x, i_y, i_z). 可能与该网格中的颗粒发生接触的颗粒只可能位于其临近网格中, 即如图所示的上下左右共27个网格(包括当前网格本身). 出于计算效率考虑, 对当前遍历到的网格(i_x, i_y, i_z)只考虑其本身和周围26个网格中的一部分中颗粒可能发生的接触. 此时计算中需要考虑的网格用绿色标出, 不参与计算的网格用红色标出.

Fig. 3 Calculation principle for collisions between grains in the current lattice and grains in its adjacent lattices. Every single cube in this figure represents a lattice, and the blue one represents the current lattice (i_x, i_y, i_z) we calculate. Possible contacts only happen in adjacent lattices, and they are the 27 lattices (including the current lattice itself) plotted in this figure. Considering computational efficiency, only parts of the 26 adjacent lattices are involved in the calculation for the current lattice (i_x, i_y, i_z). Lattices involved in the current calculation are marked with green while lattices not involved are marked with red.

对于不同Cell间的引力, 由于需要使用Cell的质心位置和Cell内颗粒总质量, 在对系统进行外推时每一步均计算质心位置和总质量的变化并存储, 从而进一步加速计算.

2.6.3 并行算法

随着计算机科学技术的不断发展, 高性能计算正成为解决实际问题的重要工具, 而并行计算作为高性能计算中重要的细分领域, 正在计算、仿真、

数据处理等多方面发挥越来越重要的作用. 硬件架构上来看, 并行计算发展早期主要使用计算机中央处理器(Central Processing Unit, CPU)进行并行, 由于CPU设计上通用性的需求, 其基本计算模块的数量较少, 图形处理器(Graphics Processing Unit, GPU)在这种情况下诞生, 成为并行计算硬件架构的未来趋势.

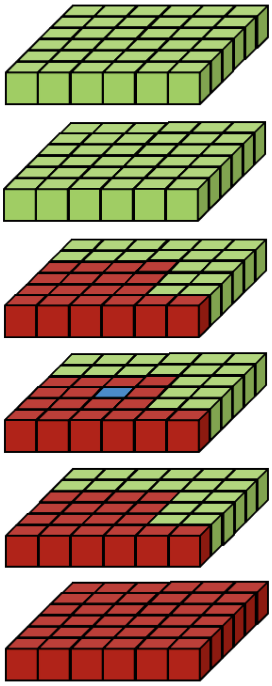

图 4 计算同一Cell内颗粒间引力遍历网格时考虑的网格示意图. 对于同一Cell内的颗粒, 根据算法规定需要计算颗粒两两之间的引力作用. 出于计算效率的考虑, 在Cell内遍历网格时, 对于当前遍历到的网格(蓝色), 我们计算引力时并不考虑所有Cell内的网格,而是只考虑其中的一部分. 图中考虑的网格用绿色标出,不参与计算的网格用红色标出.

Fig. 4 Calculation principle of lattice traversal for gravities between grains in the current lattice and grains in its neighboring lattices within the same Cell. For grains in the same Cell, gravities from each other are calculated based on the algorithm. Considering computational efficiency, when doing lattice traversal within a Cell, for the current lattice (marked with blue) we only calculate gravities from grains in parts of the lattices instead of all lattices. Lattices involved in the current calculation are marked with green while lattices not involved are marked with red.

从并行计算框架上来看, 目前有诸多成熟的并行框架可供选择. Open Multi-Processing (openMP)[1]、 Open Message Passing Interface (openMPI)[2]为代表性的适用于不同计算环境和条件的CPU并行计算框架, C++11之后也提供了<thread>标准库供并行计算使用, 使用CPU并行能简单快速地将程序部署到服务器上, 从而利用服务器的多核计算资源加快计算速度. 此外, NVDIA和AMD公司也相应开发了基于自身生产的GPU的并行计算框架Compute Unified Device Architecture (CUDA)[3]和Accelerated Parallel Processing (APP)[4], 通过使用个人电脑的图形处理器, 可以方便地将并行计算程序部署在本地.

本工作中, 使用了C++中<thread>标准库提供的并行计算框架解决方案, 目的在于利用C++和其标准库便于移植的特性, 开发可移植、容易部署的并行计算程序. 程序中不同的力模型的计算由CPU串行调用不同的力模型计算函数, 函数内部采用并行结构, 以Cell为基本并行单元, 灵活地变更并行线程的结构, 从而增加计算效率. 同时, 根据前文所述, 采用了合理的Cell或网格遍历策略, 使线程竞争最小化, 进一步提升并行效率.

如图5所示, 分别用点标示了单线程和多线程(4线程)测试的结果, 测试了不同数量测试颗粒的数值实验所耗费的时间. 测试总时间为$t_{\rm tot}$, 测试颗粒总数为n. 使用函数$t_{\rm tot}=k_{\rm s}n$对单线程结果进行了拟合, 绘制了红色直线, 随后绘制直线$t_{\rm tot}=\frac{k_{\rm s}}{4}n$, 与多线程的预期结果符合得很好, 并行效率很高.

2.7 仿真参数的选取

在仿真中, 除了选择合适的积分器来减小仿真误差之外, 更重要的是对于积分器步长参数和仿真模型参数的合理选取. 在本工作中, 主要讨论法向弹性系数$k_{\rm n}$、阻尼系数γ和仿真步长δt的选取, 在仿真过程中, δt和$k_{\rm n}$共同决定了仿真的外推精度, γ决定了能量耗散的速度.

[1]https://www.openmp.org
[2]https://www.open-mpi.org
[3]https://developer.nvidia.com/cuda-toolkit
[4]https://www.amdapp.org/s/

2.7.1　$k_{\rm n}$的选取

一方面, 忽略耗散系数, 即$\gamma=0$, 考虑两个正向碰撞的小球, 有能量守恒: $\frac{1}{2}m_{\rm eff}v_0^2=\frac{1}{2}k_{\rm n}\xi_{\max}^2$, 其中$m_{\rm eff}=\frac{m_1\ m_2}{m_1+m_2}$, v_0为接触前两个颗粒之间的相对速度, $\xi_{\max}$为接触过程中颗粒的最大"形变"量. 在软硬球模型中, 我们希望有较小的"形变", 于是需要取较大的$k_{\rm n}$值, 根据具体的仿真条件, 可以取到合适的$k_{\rm n}$值. 在非线性弹簧模型中, 非线性弹性系数$k_{\rm n}^{\rm (non)}$值可由实验测量的材料泊松比σ、杨氏模量E 和接触颗粒的半径r来计算[28], 有: $k_{\rm n}^{\rm (non)}=\frac{4}{3}\frac{E}{1-\sigma^2}\sqrt{r}$.

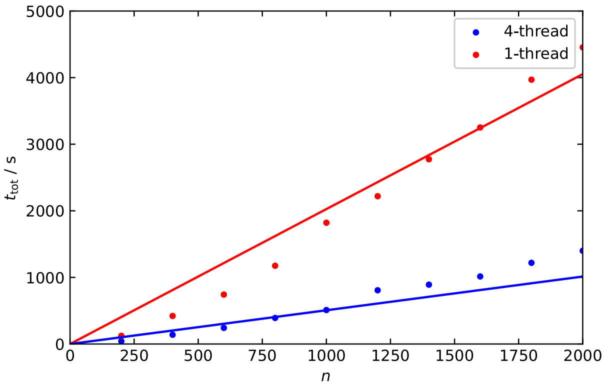

图 5　并行计算效率测试结果. 用红色和蓝色的数据点分别标示了单线程和多线程(4线程)测试的结果. 使用函数$t_{\rm tot}=k_{\rm s}n$对单线程结果进行了拟合, 得到了红色拟合直线, 同时根据拟合结果画出$t_{\rm tot}=\frac{k_{\rm s}}{4}n$的直线图, 与多线程的结果预期符合得很好, 并行效率很高.

Fig. 5　The test result of the parallel computation efficiency. Results of 1-thread and multi-thread (4-thread) are marked with red and blue scatter points respectively. Function $t_{\rm tot}=k_{\rm s}n$ is used for a fitting of the 1-thread result and the red line is obtained. A blue line representing $t_{\rm tot}=\frac{k_{\rm s}}{4}n$ is plotted based on the 4-thread result, which meets the multi-thread computation result well and the parallel computation efficiency is high.

另一方面, 在接触的积分过程中, 我们希望有较多的积分次数, 而$k_{\rm n}$值决定了接触的持续时间. 容易写出ξ的常微分方程:

$$m_{\rm eff}\ddot{\xi}+\gamma\dot{\xi}+k_{\rm n}\xi=0\,.$$

这是一个二阶常系数微分方程, 由初值: $t=0$, $\xi=0;\dot{\xi}=v_0$可以给出解析解:

$$\xi=\frac{v_0}{\omega}\exp\left(-\frac{\gamma}{2\ m}t\right)\sin\omega t\,,$$

$$\dot{\xi}=\frac{v_0}{\omega}\exp\left(-\frac{\gamma}{2\ m}t\right)\left[\omega\cos\left(\omega t\right)+\frac{\gamma}{2\ m}\sin\left(\omega t\right)\right]\,,$$

其中, $\omega=\sqrt{\frac{k_{\rm n}}{m_{\rm eff}}-\frac{\gamma^2}{4\ m_{\rm eff}^2}}$. 于是整个碰撞发生的时间为:

$$t-t_0=\frac{\pi}{\omega}=\frac{\pi}{\sqrt{\frac{k_{\rm n}}{m_{\rm eff}}-\frac{\gamma^2}{4\ m_{\rm eff}^2}}}\,.\qquad(1)$$

如(1)式所示, 当$k_{\rm n}$较大时, 碰撞的时标较短, 此时若要求积分过程中有较多的积分次数, 积分步长需要取得很小, 仿真的总体计算开销便会增大. 因此, 需要选择合适的$k_{\rm n}$值, 从而达到模型合理和计算效率的平衡.

Schwartz等[11]在描述DEM仿真程序PKDGRAV时考虑了对$k_{\rm n}$选取的两种情况. 第一种情况考虑动态的颗粒碰撞接触过程, 在采用线形弹簧模型的前提下, 可以由v_0及$\xi_{\max}$得到估计的$k_{\rm n}$值. 由能量守恒式$\frac{1}{2}m_{\rm eff}v_0^2=\frac{1}{2}k_{\rm n}\xi_{\max}^2$容易得到$k_{\rm n}\sim m_{\rm eff}(\frac{\dot{\xi}_{\max}}{\xi_{\max}})^2$. 第二种情况考虑低速的颗粒聚集相互挤压形成的准静止状态, 通过估计颗粒再接触过程中的最大围压得到$k_{\rm n}$值. 假设高度H的容器中装满半径为s的小球, 小球密度为ρ, 在重力加速度a_g作用下底层小球受到$\sim\ \phi\rho a_g Hs^2$的压力, 其中ϕ为小球颗粒的疏松度, 于是$\phi\rho$为系统总体密度, 因此有$k_{\rm n}\sim\frac{\phi\rho a_g Hs^2}{\xi_{\max}}$. 在实际仿真过程中选取$k_{\rm n}$值可以参考二者之间的较大值.

2.7.2　γ的选取

将(1)式得到的时间代入方程的解, 可以得到反弹之后两微粒之间的相对速度:

$$v=v_0\exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4\ m_{\rm eff}k_{\rm n}-\gamma^2}}\right)\,,$$

速度的衰减由耗散系数γ决定, 于是有:

$$\frac{v}{v_0}=\exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4m_{\rm eff}k_{\rm n}-\gamma^2}}\right)\,,$$

这一数值可以由实验测量得到.

2.7.3　δt的选取

δt的选取决定了仿真外推过程中积分器带来的误差的大小, 在颗粒接触过程中, 积分的步数越多, 结果越准确. 一个直观的想法是使用上面的指标$\frac{v}{v_0}=\exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4\ m_{\rm eff}k_{\rm n}-\gamma^2}}\right)$来进行$\delta t$的选取. 考

虑(1)式给出的接触持续时间, 将积分步长δt表示为如下形式:

$$\delta t = C\frac{\pi}{\omega} = C\frac{\pi}{\sqrt{\frac{k_\mathrm{n}}{m_\mathrm{eff}} - \frac{\gamma^2}{4\ m_\mathrm{eff}^2}}}\,, \tag{2}$$

其中C为一个常数. 在仿真之前, 可以根据仿真条件, 计算一个简单算例, 考虑仿真中可能出现的v_0最大的情形下, 当前C值所决定的$\frac{v}{v_0}$值是否与理论分析相当, 如果相差较大, 则对C进行更改并迭代, 直到$\frac{v}{v_0}$符合理论分析的值.

事实上, 在绝大部分情况下, δt的取值由k_n决定, 因为阻尼系数γ在大多数情况下较小, 则有(2)式的近似: $\delta t \sim C\pi\sqrt{\frac{m_\mathrm{eff}}{k_\mathrm{n}}}$. 数值实验表明, 对于相同的$k_\mathrm{n}$值, 不同的$\gamma$取值时, 即使始终采用$\gamma = 0$时的$C$值进行计算, 所得到的结果均能保证基本与二体接触问题中的$\frac{v}{v_0}$理论值相符.

3　测试算例

3.1　k_n、γ、δt的取值实验

上文介绍了k_n、γ、δt的取值思路, 下面通过实验来验证上文的理论推导和分析. 取$k_\mathrm{n} = 10^5$ N$\cdot$ m^{-1}, $\gamma = 100\ \mathrm{N\cdot s\cdot m^{-1}}$, 为不失一般性, 考虑一颗粒与平面的接触, 颗粒从一定高度下落, 经平面反弹后达到新的高度, 由于耗散的存在, 新的高度较原高度较低. 取颗粒密度$\rho = 2\times10^3\ \mathrm{kg\cdot m^{-3}}$, 颗粒半径均为$r = 0.1$ m, 此时有$e = \frac{v}{v_0} \sim 0.84$, 容易推导, 前后的高度$h_0$与$h$的关系为: $\frac{v}{v_0} = \sqrt{\frac{h}{h_0}}$, 取初始$C = 0.1$, 如果仿真得到的$\frac{v}{v_0}$或$\sqrt{\frac{h}{h_0}}$与理论值0.84相差过大, 则认为此时的积分步长选取不合适, $C \rightarrow \frac{C}{2}$, 如此迭代, 得到合适的积分步长$\delta t$, 如图6所示, 选择$\frac{v}{v_0}$或$\sqrt{\frac{h}{h_0}}$作为参考指标, 当$C$值足够小时, 二者均能够收敛到理论值.

进一步, 我们可以计算不同k_n和γ值下的耗散$\frac{v}{v_0}$的理论值, 同时针对不同的k_n和γ值仿真得到的结果并与理论值进行比较. 上文中提到, k_n在接触过程中起到决定性作用, 因此对于相同的k_n在不同的γ取值下, 可以使用相同的C值, 即相同的积分步长. 图7所示的数值实验即采取这样的计算策略, 对于给定的k_n和一组γ值, 使用$\gamma = 0$迭代获得C值, 对所有相同k_n下的γ采取同一C值, 即同一积分步长进行计算. 取两个颗粒密度$\rho = 2\times10^3\ \mathrm{kg\cdot m^{-3}}$、颗粒半径$r = 0.1$ m的球形颗粒单元, 发生相向初始相对速度$v_0 = 0.01\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$的碰撞, 记录碰撞后的相对速度$v$, 然后计算仿真结果($e_\mathrm{sim} = \frac{v}{v_0}$)的值, 于是可以得到上述颗粒条件下的$k_\mathrm{n}$、$\gamma$和仿真耗散$e_\mathrm{sim} = \frac{v}{v_0}$的关系图. 结果如图7所示, 其中白色部分表示$4m_\mathrm{eff}k_\mathrm{n} - \gamma^2 < 0$, 为过阻尼情况, 不进行仿真, 其余部分颜色与颜色条上不同$\frac{v}{v_0}$取值相对应, 表征当前k_n、γ取值下仿真得到的系统能量耗散结果(左图), 与相应的理论值做差, 计算$|e_\mathrm{sim} - e_\mathrm{theory}|$得到理论值和仿真值的差值(右图), 其中, $e_\mathrm{theory} = \exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4\ m_\mathrm{eff}k_\mathrm{n} - \gamma^2}}\right)$. 由图可知仿真结果$e_\mathrm{sim}$与前述理论的$e_\mathrm{theory}$符合得较好.

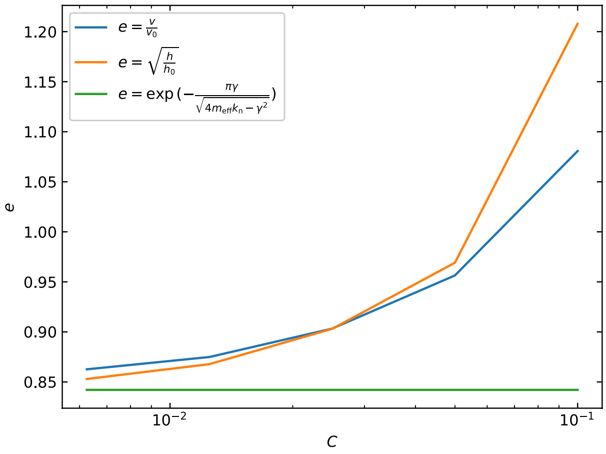

图 6　迭代C值得到合适的积分步长. 图中曲线代表随着C值的变化e值的变化情况. 数值试验的结果用蓝色和橙色分别表示使用$e = \frac{v}{v_0}$和$e = \sqrt{\frac{h}{h_0}}$两种方式仿真得到e值. 随着C值的减小, 两种数值仿真结果均能够收敛到理论的$e = \exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4\ m_\mathrm{eff}k_\mathrm{n} - \gamma^2}}\right)$.

Fig. 6　C value iteration for suitable time step for propagation. The curves plotted are e values with respect to the change of C value. Numerical results are plotted in blue and orange for simulated e values using function $e = \frac{v}{v_0}$ and function $e = \sqrt{\frac{h}{h_0}}$ respectively. The two numerical results are able to converge to theoretical value $e = \exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4m_\mathrm{eff}k_\mathrm{n} - \gamma^2}}\right)$ with the decrease of the C value.

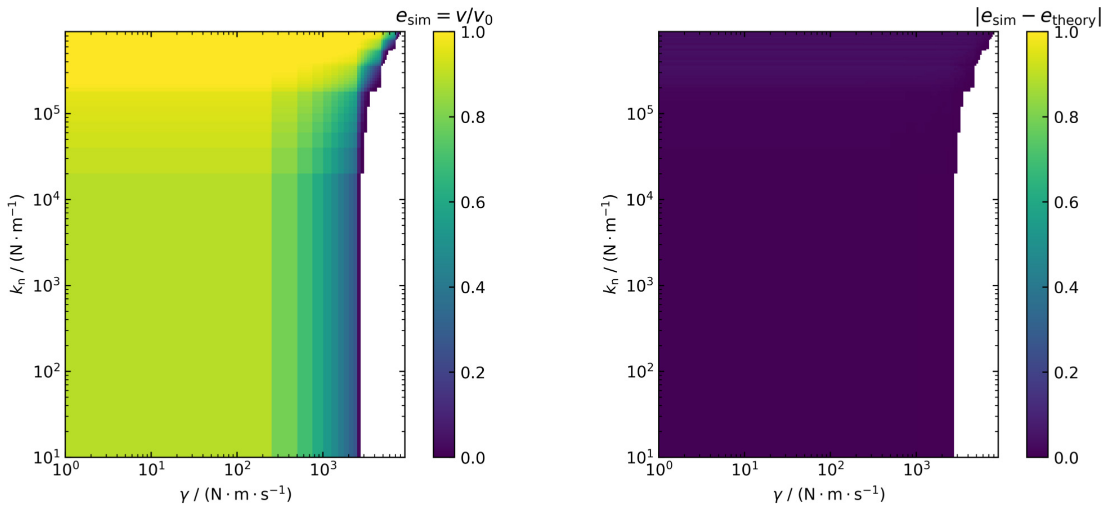

图 7　通过数值实验仿真得到的$k_{\rm n}$、γ、$\frac{v}{v_0}$关系图(左)和数值仿真结果与理论值的差值图(右). 数值试验的结果通过测量两颗粒发生初始相对速度$v_0 = 0.01\ {\rm m\cdot s^{-1}}$的碰撞后的相对速度$v$得到, 定义有仿真的$e_{\rm sim} = \frac{v}{v_0}$. 数值仿真的结果与理论值的差值由计算$|e_{\rm sim} - e_{\rm theory}|$得到, 其中$e_{\rm theory} = \exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4m_{\rm eff}k_{\rm n}-\gamma^2}}\right)$. 仿真结果与理论值符合得很好.

Fig. 7　Simulation results of $k_{\rm n}$, γ, $\frac{v}{v_0}$ relationship contour (left) and the deviation of simulation value and theoretical value (right). The results of numerical tests come from measuring the relative velocity v after a collision happens between two grains with an initial relative velocity of $v_0 = 0.01\ {\rm m\cdot s^{-1}}$ and the simulated result is defined as $e_{\rm sim} = \frac{v}{v_0}$. The deviation between the simulation values and theoretical values are calculated using $|e_{\rm sim} - e_{\rm theory}|$ and $e_{\rm theory} = \exp\left(-\frac{\pi\gamma}{\sqrt{4m_{\rm eff}k_{\rm n}-\gamma^2}}\right)$. The simulation result meets the theory well.

这一实验结果说明了选取的迭代算法能够有效地在程序中确定适当的步长, 且随着积分步长的缩短, 得到的结果应更准确. 进而通过对$k_{\rm n}$、γ和耗散$\frac{v}{v_0}$关系的仿真说明了此多颗粒仿真算法及程序在两颗粒间及颗粒与平面接触的问题上能够得到合理、准确的结果, 有效性得到了验证.

3.2　声波速度的仿真测量

对于碎石堆结构, 声波在碎石堆中的传播速度是重要的可观测参数, P波和S波在碎石堆中的传播速度与组成颗粒单元的物理性质紧密关联, 因此, 对于声波传播速度的研究对宏观仿真体的内部结构研究、物理性质研究有重要的意义. 实验研究表明[29], 硅酸盐或玻璃材料碎石堆中的声速约为170 ${\rm m\cdot s^{-1}}$, 我们可以使用本软件来仿真这一声速数据.

设置12.5 mm × 12.5 mm × 50 mm的仿真区域, 底部和顶部采用接触边界, 即对应于$z = 0$ mm和$z = 50$ mm设置接触边界条件, 四壁采用循环边界条件进行构造. 在仿真区域中添加颗粒(直径为0.5 mm的均匀球), 基于颗粒尺寸选择边长为0.625 mm的网格尺寸, 对应此例中区域被划分为20 × 20 × 80的网格区域, 选取Cell的边长尺寸为5个网格边长.

选择颗粒的密度$\rho = 2500\ {\rm kg\cdot m^{-3}}$为一般硅酸盐的密度. 从仿真区域底部开始, 放置所需要的实验颗粒, 一直到仿真区域的颗粒高度达到18 mm为止.

使用的力学模型包括接触力和用于模拟重力环境的定常力. 采用两组接触系数进行计算, 接触系数的选择参考了Sánchez等[27]相同数值实验中的取值, 便于对实验结果进行比较, 如表1所示. 使用Leap Frog单步法积分器进行积分, 积分格式向前积分, 初始设置步长为5×10^{-9} s, 步长随着力模型参数的选择通过公式$\delta t = C\sqrt{\frac{m_{\rm eff}}{k_{\rm n}}}$自主选择.

表 1 2组声波传播实验参数选取表

Table 1 Parameters table of two sound wave propagation numerical experiments

Case Index	$k_n/(N \cdot m^{-1})$	$k_t/(N \cdot m^{-1})$	$\gamma/(N \cdot s \cdot m^{-1})$	μ
1	10^5	2.8×10^4	7.1×10^{-3}	0.5
2	1.8×10^4	5.1×10^3	3×10^{-3}	0.5

首先对整个仿真系统进行静置稳定, 在不同的重力加速度值下, 系统的能量逐渐趋于定值, 此时对位于底部的颗粒施加一个z方向大小为0.5 $m \cdot s^{-1}$的速度增量, 这一速度增量的影响会在整个系统中传播. 我们可以通过仿真这一增量传播的速度来获得这一系统中的声波的速度. 如图8所示, 两组不同颗粒参数的实验结果分别使用三角和圆形散点表示. 在实验中对同一组颗粒参数, 取不同的重力加速度g值(以地球表面重力加速度$g_e = -9.8\ m \cdot s^{-2}$为单位), 测算出不同深度处的声波传播速度. 两组数值实验的结果都表现出类似的趋势, 随着声波的传播深度的增加, 声速逐渐趋于一个定值, 这一值与重力加速度g值的关联并不明显, 但显著地受到接触系数的影响. 第二组实验所选取的接触系数导致仿真系统中的声速逐渐趋近于硅酸盐或玻璃材料碎石堆中的声速, 即红线标示出的170 $m \cdot s^{-1}$.

3.3 碎石堆小行星

对于碎石堆结构的小行星, 可以使用离散元方法对其进行仿真. 选取1000个半径为$r = 1$ m, 密度$\rho = 3 \times 10^3\ kg \cdot m^{-3}$的仿真颗粒单元, 将仿真颗粒随机分布在50 m × 50 m × 50 m的仿真区域中, 图9所示为颗粒的初始状态分布情况. 设置力学模型, 考虑引力和接触力的作用, 采用接触系数: 法向弹性系数$k_n = 1.8 \times 10^5\ N \cdot m^{-1}$, 切向弹性系数$k_t = \frac{2}{7}k_n$, 粘滞系数$\gamma = 3 \times 10^4\ N \cdot s \cdot m^{-1}$, 摩擦系数$\mu = 0.5$. 接触系数的选择参考了Sánchez等[30]针对较大颗粒尺寸的小行星设置的接触系数. 对于较小的颗粒尺寸和密度, 使用这一组接触系数使得稳定小行星中每一组接触颗粒有更小的嵌入深度. 对系统进行静置, 仿真颗粒逐渐聚集成团, 20000 s后基本达到静止, 其状态如图10所示, 考虑初始颗粒分布的状态为近似均匀分布在一个矩形多面体空间内, 最终聚合为一个类似多面体的结构.

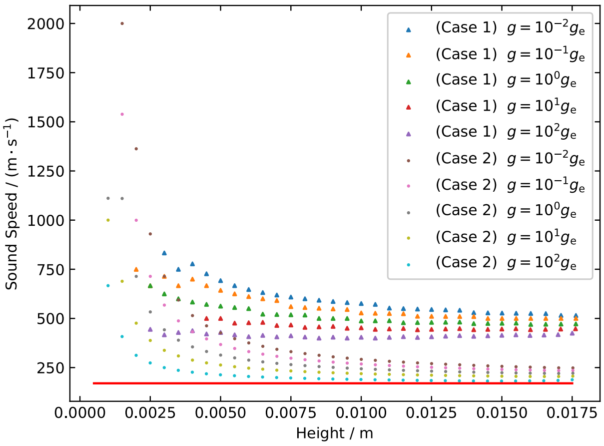

图 8 声速仿真结果图. 两组不同颗粒参数的实验结果分别使用三角和圆形散点表示. 在实验中对同一组颗粒参数, 取不同的重力加速度g值(以地球表面重力加速度$g_e = -9.8\ m \cdot s^{-2}$为单位), 测算出不同深度处的声波传播速度.

Fig. 8 Results of the sound wave propagation numerical experiment. Results of two sets of particle parameters are scattered in triangles and circles. For each set of particle parameters, sound wave propagation velocity is measured at different height using different gravitational acceleration g values (with the gravitational acceleration on the Earth's surface $g_e = -9.8\ m \cdot s^{-2}$ as a unit).

接下来, 以距离碎石堆质心的距离为标准, 保留距离$d \leqslant 10$ m的仿真颗粒, 继续静置仿真系统, 在这一过程中, 系统逐渐趋于稳定, 得到近似球体的、半径约10 m的小行星, 如图11所示.

对密度均匀的球形小天体, 其内部一点的压强计算公式为$P = \frac{2}{3}\pi G\rho_a^2(R^2 - r^2)$, 其中$R$为小行星的半径, r为小行星质心到小行星内某一点的距离, 而对于我们的仿真系统, 有

$$P_k = \frac{1}{S_k}\sum_{i=0}^{N_1}\sum_{j=0}^{N_2}\vec{f}_{ij}\hat{r}_i\ ,$$

其中k为球形球壳的标号, 不同标号标示选择距离质心不同距离的球壳, S_k为第k个球形球壳的表面积, N_1为该球壳外部与球壳k接触的颗粒总数, N_2为与颗粒i接触且位于球壳内部的颗粒总数, $\vec{f}_{ij}$为颗粒i受到颗粒j的接触力, $\hat{r}_i$为颗粒i位置指向碎石堆质心位置的单位矢量. 考虑球形颗粒组成的碎石堆的空隙, 有小行星密度$\rho_{\rm a} = \frac{\pi}{6}\rho$, 图12给出了理论值与仿真值的比较, 不难看出二者符合得很好.

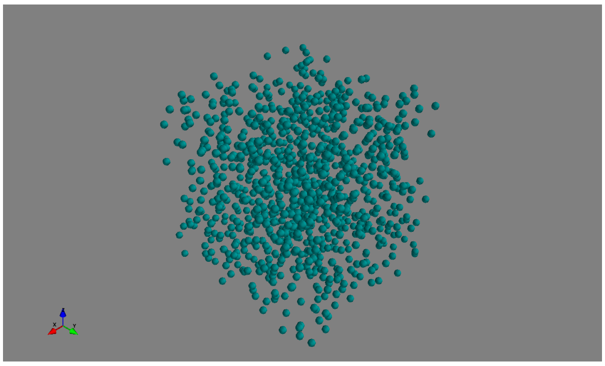

图 9 初始时刻的仿真颗粒分布. 1000个半径为$r = 1$ m的颗粒随机分布在50 m × 50 m × 50 m的仿真区域中.

Fig. 9 The original grain distribution. 1000 grains with radius $r = 1$ m are randomly distributed in a 50 m × 50 m × 50 m simulation area.

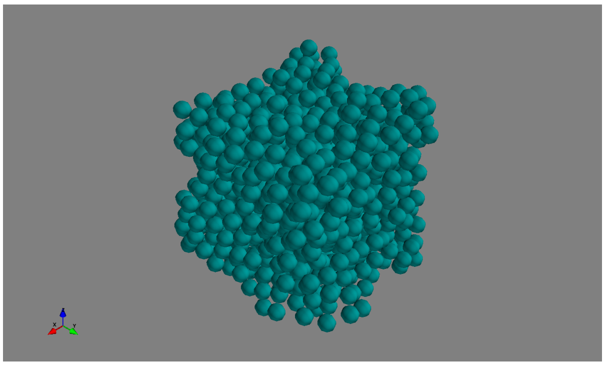

图 10 20000 s后的仿真颗粒分布

Fig. 10 Grain distribution after 20000 s simulation

3.4 旋转稳定性

小行星的自转是影响小行星演化进程的重要因素, Yarkovsky-O'Keefe-Radzievskii-Paddack (YORP)效应[31]、大天体的近距离飞越等都能够影响小行星的自转速度. 对双星系统而言, 两星间的轨旋耦合效应、潮汐效应以及可能存在的Binary YORP (BYORP)效应都会改变小天体的转速, 目前认为YORP效应是造成近地双星和小尺寸主带双星的主要成因[32]. 本工作仅考虑单星匀速自转的情形, 在不考虑粘聚力的前提下, 当有自转速度超过$\omega_{\rm c} = \sqrt{\frac{GM}{r^3}}$时, 小行星无法继续保持引力和内部接触压力的平衡, 小行星开始裂解.

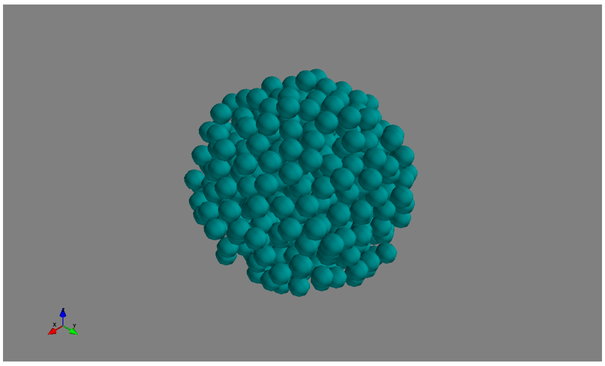

图 11 静置后得到的近球形小行星

Fig. 11 Settled spherical asteroid

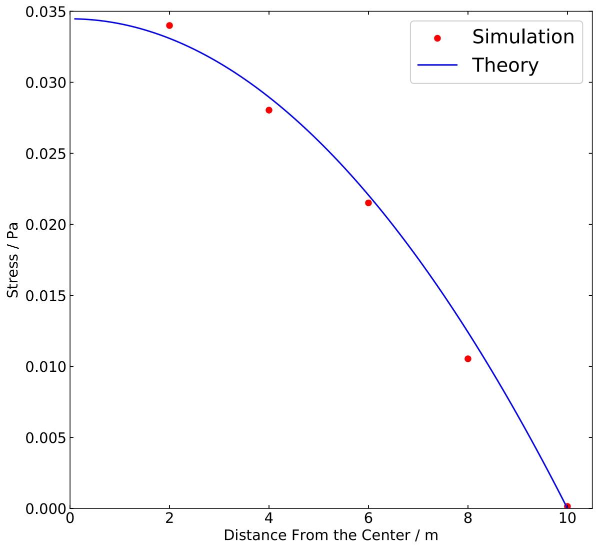

图 12 小行星内部压强仿真

Fig. 12 Asteroid inner pressure scatter comparison between simulation and theory

继续使用上一个数值实验中所计算的球形小行星模型, 使其从静止开始以$(\sqrt{2}, \sqrt{2}, 0)$为轴自转.

从0.1 ω_c的角速度开始计算, 以0.1 ω_c为角速度增加的步长直到$\omega = \omega_c$, 每一个旋转速度计算50 s. 每1 s获取一次$x^2 + y^2 = 10^2$, $20 < z < 30$的环形区域(即赤道上)的平均每个颗粒所受的向小行星外部的接触压力, 对同一个旋转速度仿真时间内所获取的所有压力值取平均, 当$\omega = \omega_c$时, 小行星此时环形区域内颗粒不发生接触, 小行星发生破碎裂解. 如图13所示, 图中展示了在小行星旋转的不断加速过程中小行星赤道上环形区域颗粒平均受到接触压力的变化情况. 小行星在逐渐加速旋转的过程中, 接触力平衡了小行星的引力, 在低速转动时保持了整个系统的平衡, 当旋转速度超过ω_c时, 小行星的引力无法维持旋转向心力, 此时组成颗粒之间接触大大减少或不接触, 即压力趋于0, 小行星发生分裂.

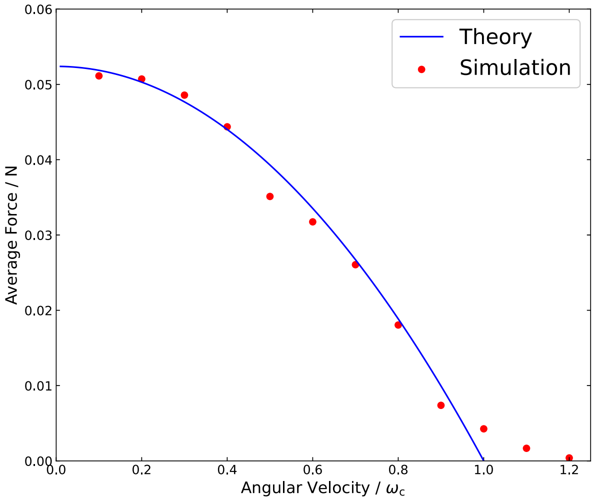

图 13 小行星自转速度与内部环形区域平均接触压力的关系

Fig. 13 Relationship between average force in an annular area and the asteroid's spin speed

4 总结

文章首次介绍了作者开发的离散元仿真软件的构建细节, 包括基本仿真单元的选取、粒子间的接触力建模和引力建模以及软件中采取的一些加速计算措施; 其次, 通过几个数值仿真实验验证了软件的仿真结果的可信性, 这些实验包括:

第3.1节中k_n、γ、δt的取值实验验证了接触过程仿真的可靠性, 证明程序仿真的基本颗粒接触过程是可靠的;

第3.2节中声波速度的仿真测量证明了碎石堆环境下多颗粒相互碰撞带来的接触力学复杂耦合计算的准确性和有效性, 是对后续碎石堆小行星仿真可靠性的有力验证;

第3.3节中碎石堆小行星从分散颗粒的引力凝聚过程验证了程序中对引力的近似处理的可靠性和有效性, 其内部分层压强的数值实验测量与理论值吻合说明程序的力学模型仿真和动力学外推过程是真实物理条件的有效、可靠的仿真;

第3.4节中碎石堆小行星旋转分解的过程验证了程序仿真小行星旋转稳定性过程的可靠性, 为后续可能进行的数值实验提供了旋转力学的验证和参考. 现有的使用离散元方法的研究中, 潮汐效应、YORP或BYORP效应对于小行星自转的研究依赖于基于旋转角速度矢量演化预测的离散元仿真过程, 这一过程常常因碎石堆小行星形状变化的影响而与刚体力学表现出显著不同, 是未来相关研究可能的重要方向. 对这些过程进行仿真模拟以提取、验证一些猜测也是作者开发此软件的初衷. 在后期的仿真模拟中, 作者会进一步完善现有的软件, 加入不同基本单元的选取、粘聚力的模拟等.

参 考 文 献

[1] McCarthy H E. Energy - Engineering - Environment. Proceedings of the Seventh Annual Frontiers of Power Technology Conference. Stillwater: Oklahoma State University, 1974, 16: 1
[2] Hapke B. Icarus, 1967, 6: 254
[3] Weidenschilling S J. Icarus, 1981, 46: 124
[4] Davis D R, Chapman C R, Greenberg R, et al. BAAS, 1982, 14: 720
[5] Fujiwara A. Icarus, 1982, 52: 434
[6] Farinella P, Paolicchi P, Zappalà V. Icarus, 1982, 52: 409
[7] Weissman P R. Nature, 1986, 320: 242
[8] Scheeres D J, Hartzell C M, Sánchez P, et al. Icarus, 2010, 210: 968-984
[9] Cundall P A. Proceedings of the International Symposium on Rock Mechanics. Nancy: International Society for Rock Mechanics, 1971, 8: 129
[10] Cundall P A, Hart R D. EngCo, 1992, 9: 101
[11] Schwartz S R, Richardson D C, Michel P. Granular Matter, 2012, 14: 363
[12] Cheng B, Asphaug E, Yu Y, et al. PSJ, 2022, 3: 249

[13] Hocking G, Mustoe Ggw, Williams J R. ASCE Specialty Conference. San Francisco: Civil Engineering in the Arctic Offshore, 1985: 962-970
[14] Ferellec J F, McDowell G R. Granular Matter, 2010, 12: 459
[15] Sánchez P, Renouf M, Azéma E, et al. Icarus, 2021, 363: 114441
[16] Boon C W, Houlsby G T, Utili S. CGeot, 2012, 44: 73
[17] McDowell G R, Harireche O. Getq, 2002, 52: 69
[18] Lu M, McDowell G R. Granular Matter, 2006, 9: 69
[19] Wang L, Park J Y, Fu Y. Construction and Building Materials, 2007, 21: 338
[20] Podlozhnyuk A, Pirker S, Kloss C. CPM, 2017, 4: 101
[21] Herrmann H J, Luding S. CMT, 1998, 10: 189
[22] Cundall P A, Strack O D L. Géotechnique, 1979, 29: 47
[23] Hertz H. JRAM, 1882, 92: 156
[24] Tsuji Y, Tanaka T, Ishida T. Powder Technology, 1992, 71: 239
[25] Le S, Gs G, Tc H, et al. PhRvE, 2001, 64: 051302
[26] Allen M P, Tildesley D J. Computer Simulation of Liquids. Second edition. Oxford: Oxford University Press, 2017
[27] Sánchez P, Scheeres D J. ApJ, 2011, 727: 120
[28] Johnson K L. Contact Mechanics. Cambridge: Cambridge University Press, 1985: 107-144
[29] Teramoto K, Yano H. Measurements of Sound Speed in Granular Materials Simulated Regolith. 36th Annual Lunar and Planetary Science Conference. League City, Texas, March 14-18, 2005
[30] Sánchez D P, Scheeres D J. Icarus, 2012, 218: 876
[31] Bottke W F Jr, VokrouhlickýD, Rubincam D P, et al. AREPS, 2006, 34: 157
[32] Walsh K J, Richardson D C, Michel P. Nature, 2008, 454: 188

Discrete Element Method Simulation System for Asteroid

LIU Mu-lin HOU Xi-yun
(Department of Astronomy and Space Science, Nanjing University, Nanjing 210023)

Abstract Asteroid detection is now a hot spot of solar system exploration. The understanding of the evolution of asteroids has a great benefit on researches to the origin of the solar system. An important topic of the evolution research is the evolution of inner structures of asteroids, in other words, asteroids' evolution of shapes and structures under multiple mechanisms. A common method to simulate the dynamical evolution of asteroids is Discrete Element Method (DEM) under the assumption that asteroids are in rubble-pile structures. Some teams have developed several kinds of softwares for DEM simulations. The basics, realization, algorithms of our software "Multi-particle system simulation software based on DEM algorithm" are introduced in this article and the software is verified using two body collision, sound wave propagation, inner stress of asteroid, and asteroid spin disruption setups.

Key words methods: numerical, asteroids: general, asteroids: evolution